

Nicht genehmigtes Protokoll der Mitgliederversammlung der AGTC beim 59. Symposium für Theoretische Chemie in Zürich am 12. September 2023

Beginn: 16:00 Uhr

Ende: 17:30 Uhr.

Sitzungsleitung: Prof. Peter Saalfrank (Universität Potsdam)

1. Eröffnung der Sitzung
 - Genehmigung der Tagesordnung
 - Genehmigung des Protokolls der Mitgliederversammlung vom 21.09.2022
2. Bericht des Vorstands (Bericht)
3. Bericht des Kassenprüfers (Bericht / Beschluss)
4. Nach- / Neuwahl Mitglieder Hellmann-Komitee (Vorschläge / Wahl)
5. Diskussion Geschäftsordnung AGTC (Bericht / Beschluss)
6. Sonstiges
7. RDM und NFDI (Bericht / Diskussion)

TOP 1: Eröffnung der Sitzung

- Die Tagesordnung wird einstimmig angenommen.
- Zum Protokoll der letzten Mitgliederversammlung der AGTC (21.09.2022), das per E-Mail verschickt wurde, gibt es keine Anmerkungen, und es wird ohne Gegenstimme genehmigt. Das Protokoll wird außerdem in Kürze in der neuesten Ausgabe der Info-TC-Seite (vermutlich 2023/11) auf der AGTC-Homepage im Pfad [/Aktuelles/Info TC](#) unter

https://agtc.univie.ac.at/?page_id=54

zu finden sein. Zusätzlich sind neuere Protokolle ab jetzt im Pfad [/Aktuelles/Aktuelle Protokolle der Mitgliederversammlungen](#) unter

https://agtc.univie.ac.at/?page_id=1254

einschbar.

TOP 2: Bericht des Vorstands

- *Vorstandswahlen 2023:*

Im April wurden Vorstandswahlen für die Amtsperiode 2023-2025 durchgeführt (zur Amtsperiode: siehe weiter unten). Von 253 wahlberechtigten AGTC-Mitgliedern wurden 108 gültige Stimmen abgegeben (42.7 % Wahlbeteiligung).

Die meisten Stimmen erhielten: Peter Saalfrank (Potsdam, 75.9 %), Leticia González (Wien, 65.7 %), Markus Reiher (Zürich, 50.9 %), Andreas Dreuw (Heidelberg, 50.9 %), Beate Paulus (Berlin, 45.4 %).

Peter Saalfrank ist somit wiedergewählter Vorsitzender der AGTC, Markus Reiher (wiedergewählt) wurde per Vorstandsbeschluss zum stellvertretenden Vorsitzenden bestimmt, Leticia González (wiedergewählt), Andreas Dreuw (neu gewählt) und Beate Paulus (neu gewählt) sind weitere Vorstandsmitglieder.

Hinzu kommen die von den Trägergesellschaften der AGTC bestätigten Vertreter der Gesellschaften, Christian Ochsenfeld (München, DBG), Axel Gross (Ulm, DPG) sowie Stefan Grimme (Bonn, GDCh).

Das Plenum bedankt sich herzlich bei den ausscheidenden Vorstandsmitgliedern, Christel Marian (Düsseldorf) und Wim Klopper (Karlsruhe).

- *Mitgliedschaft:*

Zum Stichtag 31.12.2022 zählte die AGTC 251 Mitglieder (2021: 240, 2020: 237, 2019: 231). Der Jahresbeitrag beträgt ab 2023 20 EUR – siehe hierzu das Protokoll der Mitgliederversammlung vom 21.09.2022. Details zur Mitgliedschaft finden sich unter

https://agtc.univie.ac.at/?page_id=58.

Dort findet sich auch ein Beitrittsformular, welches an die DBG zu senden ist (unter geschaefsstelle@bunsen.de oder per Post an Deutsche Bunsengesellschaft (DBG), z.Hd. Kate Weber, Varrentrappstr. 40-42, D-60486 Frankfurt).

- *Email-Verteiler:*

Es gibt einen Email-Verteiler unter agtc@lists.posteo.de, welcher moderiert wird. Direkte Emails an den Verteiler sind nicht möglich, sondern ergehen bitte entweder an Frau Kate Weber unter geschaefsstelle@bunsen.de, oder an den AGTC-Vorsitzenden unter peter.saalfrank@uni-potsdam.de, von wo sie per Email-Verteiler den AGTC-Mitgliedern zugänglich gemacht werden.

- *AGTC-Website:*

Die AGTC-Website ist nach wie vor unter

<https://agtc.univie.ac.at>

zu erreichen. Die Administration wird derzeit von Rainer Neumann (rainer.neumann@uni-potsdam.de) übernommen.

- *Arbeitsgruppen, Nachwuchsgruppen auf der AGTC-Homepage:*

Auf der AGTC-Homepage im Pfad [/AGTC/Arbeitsgruppen](#) unter dem Link

https://agtc.univie.ac.at/?page_id=62

sind mit der AGTC verbundene *Forschungsgruppen* (derzeit 79) und *Nachwuchsgruppen* (derzeit 17) gelistet.

Bezüglich der jeweiligen Definition der *Forschungsgruppen* und *Nachwuchsgruppen* gibt die Website ebenfalls genau Auskunft.

Es wird darum gebeten zu prüfen, ob diejenigen, die es wünschen, als Forschungsgruppe oder Nachwuchsgruppe gelistet sind oder nicht – im Bedarfsfall wende man sich bitte wiederum entweder an Frau Kate Weber unter geschaefsstelle@bunsen.de, oder an den AGTC-Vorsitzenden unter peter.saalfrank@uni-potsdam.de. Es erfolgen auch jährlich Emails der AGTC, in denen zu Meldungen zu den Nachwuchsgruppen aufgefordert wird.

- *Preise:*

Im Pfad [/Preise](#) unter

https://agtc.univie.ac.at/?page_id=39

sind die aktuell mit der AGTC verbundenen Preise gelistet:

- Der Sigrid-Peyerimhoff-Promotionspreis für Theoretische Chemie,
- der Hans G. A. Hellmann-Preis für Theoretische Chemie

– und der Erich-Hückel-Preis.

Die ersten beiden Preise werden von der AGTC vergeben (über die Vergabe entscheidet die “Hellmann-Preis-Kommission”), der dritte von der GDCh. Alle Preise werden auf dem jeweiligen Symposium für Theoretische Chemie vergeben. Regeln zum Vorschlag der Preisträger / Preisträgerinnen sind unter dem obigen Link zu finden.

Die Deadline für die Bewerbung zum Sigrid-Peyerimhoff-Promotionspreis ist jeweils der **1. Februar** eines Jahres, wobei die Promotion im Jahr zuvor abgeschlossen worden sein muss. Es erfolgt Selbstbewerbung, die an den AGTC-Vorsitzenden zu senden ist. Der Preis wird gemäß den Richtlinien für hervorragende wissenschaftliche Leistungen aus dem Gesamtbereich der Theoretischen Chemie an (bis zu zwei) jüngere Nachwuchswissenschaftlerinnen / Nachwuchswissenschaftler verliehen, die ihre Doktorarbeit an einer Einrichtung in Deutschland, Österreich oder der Schweiz abgeschlossen haben.

Die beiden Preisträger des Jahres 2023 (Promotion 2022), sind Dr. Ansgar Pausch (KIT) und Dr. Viktor Zaverkin (Universität Stuttgart). Die Preisträgerinnen und Preisträger sind gelistet unter

https://agtc.univie.ac.at/?page_id=70

Die Deadline für den Vorschlag zum Hans G. A. Hellmann-Preis ist jeweils der **15. März** eines Jahres. Vorschläge sind an den AGTC-Vorsitzenden zu senden. Der Hellmann-Preis wird nach Möglichkeit jährlich vergeben. Die Voraussetzungen für den Hellmann-Preis sind ein Lebensalter von maximal 40 Jahren, eine herausragend abgeschlossene Habilitation oder äquivalente Leistung, und bisher keine Lebenszeit-Professur. Der Bewerber / die Bewerberin sollte mit der deutschsprachigen Forschungslandschaft verbunden sein. Die Preisträgerinnen und Preisträger sind gelistet unter

https://agtc.univie.ac.at/?page_id=68

Die Preisträgerin für das Jahr 2023 ist Prof. Dr. Carolin König von der Leibniz-Universität Hannover.

Der Erich-Hückel-Preis wird zweijährig (in geraden Jahren) von der GDCh vergeben, die auch Vorschläge entgegennimmt. Die früheren Preisträger sind Werner Kutzelnigg (2016), Hans-Joachim Werner (2018) und Gernot Frenking (2020) und Sigrid D. Peyerimhoff (2022), siehe

<https://www.gdch.de/gdch/preise-und-auszeichnungen/gdch-preise/erich-hueckel-preis.html>

Die GDCh würdigt mit dem Erich-Hückel-Preis hervorragende Arbeiten von Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftlern auf dem Gebiet der Theoretischen Chemie. Der Preis wird nur auf Vorschlag an die GDCh verliehen – siehe hierzu den obigen Weblink. Die Vorschläge für das Jahr 2024 sind bis **15. September 2023** zu unterbreiten. Über die Preisverleihung entscheidet eine Auswahlkommission.

Nachtrag: Die Auswahlkommission für den Erich-Hückel-Preis wurde ab Preisentscheidung für das Jahr 2024 neu zusammengesetzt und besteht nun aus: Leticia González, Universität Wien (Federführung), Irene Burghardt, Goethe-Universität Frankfurt, Oliver Kühn, Universität Rostock, Peter Saalfrank, Universität Potsdam, Ansgar Schäfer, BASF SE, Birgit Strodel, Forschungszentrum Jülich GmbH.

- *Jahresrückblicke / Trendberichte 2023:*

Die Trendberichte 2023 für die Theoretische Chemie in den “Nachrichten aus der Chemie” der GDCh wurden von Elke Fasshauer (Tübingen), Johannes Margraf (Berlin) und Eva von Domaros (Jena) verfasst. Diese können, sobald verfügbar, unter

<https://onlinelibrary.wiley.com/topic/vi-categories-18680054/virtual-issues/18680054>

eingesehen werden.

- *Info Theoretische Chemie:*

Die letzte Ausgabe der Info TC, 2022/09, entstand unter der Federführung von Leticia González (Wien). Diese und die früheren Ausgaben der Info TC sind einzusehen unter:

https://agtc.univie.ac.at/?page_id=54

Frau Prof. González, die auch für die nächste(n) Ausgabe(n) verantwortlich zeichnet, bittet hierzu dringlichst um Zuarbeit.

- *Prof. Karl Jug und Genealogieprojekt der AGTC:*

Der AGTC-Vorsitzende teilt mit, dass Professor Karl Jug, der sich vielfach für Belange der AGTC verdient gemacht hat und u.a. Gründer und langjähriger Betreuer des “Genealogieprojekts der AGTC” war, überraschend am 3. April 2023 verstorben ist. Das Plenum gedenkt seiner in einer Schweigeminute.

Der AGTC-Vorsitzende weist darauf hin, dass das “Genealogieprojekt der AGTC” nach wie vor unter

https://agtc.univie.ac.at/?page_id=93

zugänglich ist. Meldungen / Aktualisierungen können nach wie vor an Dr. Dirk Andrae (FU Berlin) gerichtet werden, unter dirk.andrae@fu-berlin.de, der sie bis auf Weiteres einpflegen wird. Der AGTC-Vorsitzende dankt Herrn Andrae für diese Bereitschaft. Herr Andrae erwähnt, dass an der Mitarbeit Interessierte sich gerne bei ihm melden mögen.

- *Symposien für Theoretische Chemie:*

Das diesjährige Symposium fand vom 11.-14. September 2023 an der ETH Zürich statt, unter hervorragender Organisation von Prof. Sandra Luber (U Zürich) und Prof. Jeremy Richardson (ETH).

Die nächsten Organisatoren und terminierten Symposien für Theoretische Chemie sind:

- STC 2024: Christoph Jacob, Jonny Proppe, Braunschweig (D), 02.-06.09.2024
- STC 2025: Beate Paulus, Bettina Keller, Berlin (D), 22.-26.09.2025
- STC 2026: Daniel Boese, Graz (A) , 13.-17.09.2025
- STC 2027: Robert Berger, Michael von Domaros (D)

TOP 3: Kassenprüfung der AGTC für das Jahr 2022

Die Kassenprüfung wurde von Alexander A. Auer (MPI für Kohlenforschung) durchgeführt. Die Kernpunkte sind:

- Das Gesamtvermögen im Hellmann-Fonds beträgt 88.164,09 EUR (2021: 86.946,84 EUR).
- Das Guthaben der AGTC per 31.12.2022 beträgt 64.546,69 EUR (2020: 73.589,69 EUR).
Anmerkung: Der geringere Betrag 2022 ergibt sich aus einer Umbuchung von Spenden (12.000 EUR) für den Peyerimhoff-Preis auf separates Peyerimhoff-Preis-Konto, aus dem künftig Abbuchungen für den Preis (ab 2023: 2000 EUR) erfolgen.

Der Kassenprüfer empfiehlt, den Kassenabschluss für 2022 zu akzeptieren.

Die Mitgliederversammlung stimmt dem Vorschlag ohne Gegenstimme zu.

TOP 4: Nach- Neuwahl Mitglieder Hellmann-Preiskomitee

Das Hellmann-Komitee entscheidet über die Vergabe der jährlichen Hans. G.A. Hellmann- und Sigrid-Peyerimhoff-Preise und besteht aus sieben Mitgliedern, davon ein(e) Vorsitzende(r). Es sind maximal vier zweijährige Amtsperioden möglich, nach zwei Amtsperioden ist eine Wiederwahl erforderlich. Wieder- und Neuwahlen von Einzelpersonen finden auf der jeweiligen STC für die darauffolgende Amtsperiode statt.

Aus dem Komitee der Amtsperiode 2021-2023 müssen nach viermaliger Amtszeit ausscheiden: Beate Paulus (FU Berlin, Vorsitz), Robert Berger (Marburg), Bernd Engels (Würzburg).

Von den verbliebenen vier Mitgliedern (Irene Burghardt (Frankfurt), Johannes Kästner (Stuttgart), Oliver Kühn (Rostock), Sandra Luber (Zürich)) muss keines wiedergewählt werden, alle vier erklären ihre Bereitschaft, eine weitere Amtsperiode zu wirken.

Für die drei ausgeschiedenen Mitglieder sind Neuwahlen erforderlich. Es werden als Kandidierende Vera Krewald (Darmstadt), Ralf Tonner-Zech (Leipzig) und Reinhold Fink (Tübingen) nominiert und jeweils ohne Gegenstimme gewählt.

Somit besteht das Hellmann-Preiskomitee für die Amtsperiode 2023-2025 aus folgenden Personen: Irene Burghardt (Frankfurt), Reinhold Fink (Tübingen), Johannes Kästner (Stuttgart), Vera Krewald (Darmstadt), Oliver Kühn (Rostock), Sandra Luber (Zürich), Ralf Tonner-Zech (Leipzig). Ein(e) Vorsitzende(r) ist bis zur nächsten Auswahlrunde (2024) zu bestimmen.

Nachtrag: Also Vorsitzender wurde mittlerweile Ralf Tonner-Zech bestimmt.

Das Plenum wünscht dem Komitee gute Arbeit und bedankt sich bei den ausgeschiedenen Mitgliedern.

TOP 5: Diskussion Geschäftsordnung der AGTC

Der Vorstand der AGTC schlägt vor, die existierende Geschäftsordnung der AGTC unter https://agtc.univie.ac.at/?page_id=150 in folgenden Punkten zu ändern:

- **Alt:** Die bisherige Amtszeit von AGTC-Vorstandsmitgliedern beträgt zwei Jahre mit einer Amtsperiode 01. Januar eines Jahres - 31. Dezember des Folgejahres.
Neu: Die bisherige Amtszeit von AGTC-Vorstandsmitgliedern beträgt zwei Jahre mit einer Amtsperiode 01. Juli eines Jahr - 30. Juni des übernächsten Folgejahres.
- **Alt:** Vorstandsmitglieder können einmalig wiedergewählt werden.
Neu: Mehr als einmalige Wiederwahl ist möglich. Die Vorsitzende / der Vorsitzende der AGTC darf weiterhin nur zwei Amtszeiten begleiten.
- Formulierungen wie “Der Vorsitzende” und “Er beruft” in der GO sollen durch beide Geschlechter einschließende Formulierungen ersetzt werden.

Mit diesen Änderungen sollen gelebte Realitäten, die im Sinne der kontinuierlichen Arbeit des Vorstands auch geboten sind, dargestellt werden.

Beschluss: Nach einstimmiger Abstimmung wird der Vorsitzende der AGTC beauftragt, die Änderungen der GO in die Wege zu leiten.

Nach §9 der aktuellen GO ist hierzu die Zustimmung der Mitgliederversammlung (2/3-Mehrheit) und die der Trägergesellschaften DBG, DPG und GDCh notwendig. Der AGTC-Vorsitzende wird einen Textvorschlag der neuen GO erarbeiten, dem Vorstand der AGTC zur Prüfung vorlegen und an die Trägergesellschaften weiterleiten.

TOP 6: Sonstiges

- Christoph Jacob stellt kurz die Planungen für das Symposium für Theoretische Chemie 2024 in Braunschweig vor.

- Elke Fasshauer gibt ihre Tätigkeit als Facebook-Administratorin der AGTC-Homepage auf. Die Funktion ist derzeit vakant.
- Annika Bande gibt ihre Tätigkeit als Verfasserin von “kurz notiert” in “Nachrichten aus der Chemie” auf.

Anmerkung: Mittlerweile wurde Tim Neudecker (Bremen) als Nachfolger für die Tätigkeit von Annika Bande bestimmt.

TOP 8: RDM und NFDI

Im Anschluss an die AGTC-Mitgliederversammlung findet eine Vorstellung mit Aussprache zu Aktivitäten zum Thema Research Data Management (RDM) und Nationale Forschungsdateninfrastruktur (NFDI), hier insbesondere mit Betonung auf theoretisch-chemische Aspekte, statt. Hierzu gab es im Vorfeld bereits am 06. März 2023 ein AGTC-internes Zoom-Treffen.

In zwei Impulspräsentationen stellen B. Schröder (AG Mata, Göttingen) und Ch. Jacob (Braunschweig) aktuelle Aktivitäten und Initiativen vor. In der Diskussion wird die Wichtigkeit des Themas betont und auch die Notwendigkeit, TC-spezifische Entwicklungen voranzutreiben. Die AGTC unterstützt diese Initiativen, über die an anderer Stelle ausführlicher zu berichten sein wird, ausdrücklich.

Der Vorsitzende schließt die Sitzung.

Potsdam, den 15. Oktober 2023

gez.: Peter Saalfrank